SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE LAPLACE PARA O POTENCIAL DE LIGAÇÃO IÔNICA

Bathista, A. L. B. S., Ramos, R. J., Nogueira, J. S.

Departamento de Física - ICET - UFMT, MT, Av. Fernando Correa S/N
CEP 78060-900 Brasil, e-mail: andrelbbs@hotmail.com

Resumo

Como sabemos a ligação química entre os átomos depende dos elétrons de valência: estes elétrons externos tem o papel de interação com outros átomos. Normalmente os elementos químicos estão procurando tornar-se o mais estável possível e para isso eles devem completar suas estruturas eletrônicas atingindo a configuração do gás nobre. Para determinarmos o potencial de interação entre dois átomos, existe na literatura várias equações. No nosso caso mostramos o comportamento do potencial interativo da ligação iônica através da equação mais geral para esse caso, sendo esta a equação proposta por Bohr e Mayer que apresenta o potencial total (atração + repulsão). Neste trabalho consideramos a forma do átomo como o de uma esfera, devido a isso utilizamos uma equação diferencial esférica, que corresponde-se com o potencial total . A equação diferencial esférica mais adotada para este tipo de solução é a equação de Laplace. A equação esférica de Laplace foi resolvida para a ligação iônica do NaCl, analisadas suas condições de contorno e plotado os gráficos dos potenciais de atração e repulsão.

1 INTRODUÇÃO

A ligação química entre os átomos depende essencialmente das características do chamado elétron de valência: aquele mais externamente exposto, já que são estes elétrons externos que tem o papel de interação de contato com outros átomos.

Os elementos químicos, principalmente aqueles com um único elétron faltando ou sobrando (7A, 1A, 1B) apresentam diferente capacidades em atraírem elétrons. Normalmente os elementos químicos estão procurando tornar-se o mais estável possível e para isto eles devem completar suas estruturas eletrônicas atingindo a configuração do gás nobre.

Consideremos agora dois elementos químicos A e B (ambos no estado gasoso) que se aproximam. Se a diferença de eletronegatividade entre eles for muito grande. Haverá uma transferência permanente do elétron de um para o outro, gerando a chamada ligação iônica. Neste caso, quando os elementos estão a uma determinada proximidade eles se ionizam, criando um par de cátion-ânion que atraem-se mutualmente pelo potencial que há entre os dois. Um exemplo disto é a ligação do *NaCl*. Atingindo uma certa proximidade

o *Na* perde seu elétron de valência para o *Cl*, de modo que a ligação química entre eles fica determinada pelo potencial de atração do tipo Coulombiano

$$\varphi_{at} = -\frac{e^2}{r}$$

A medida que os núcleos aproximam-se mais e mais, começa a surgir uma repulsão entre eles devido a superposição das suas nuvens eletrônicas. O potencial repulsivo entre os núcleos pode ser expresso, como sugerido por Bohr e Meyer (1914 – Chemical Abstract)

$$\varphi_{rep} = be^{-ar}$$

onde *b* e *a* são constantes arbitrárias desenvolvidas por Bohr e Meyer. O potencial total para uma ligação iônica é uma combinação entre o potencial de atração e repulsão

$$\varphi_{total} = \varphi_{at} + \varphi_{rep} \qquad [1]$$

sendo φ_{at} o potencial de atração e φ_{rep} o potencial de repulsão, estes potenciais estão expressos na figura 1.

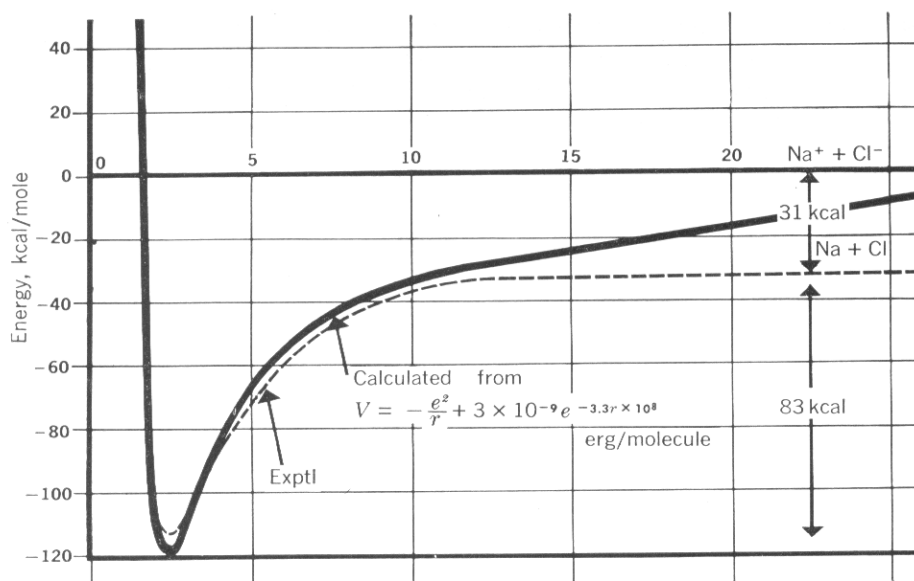
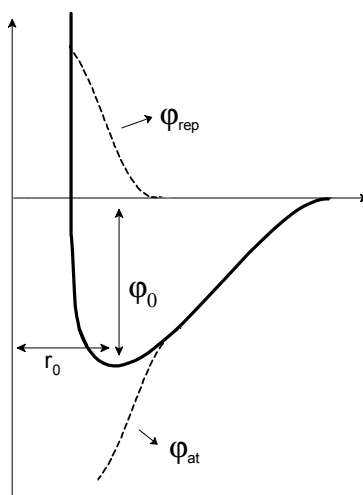



Figura 1: Potencial de ligação, r_0 é a posição de equilíbrio entre os átomos, corresponde a soma dos raios iônicos dos constituinte da molécula de NaCl, isto é $r_0 = r_{Na^+} + r_{Cl^-}$.

em alguns livros o potencial de atração e de repulsão é dado em forma de solução e não há desenvolvimento destas, como por exemplo o potencial de repulsão e atração nas referências 1-3,

$$\varphi_{rep} = be^{-ar} \qquad [2]$$

$$\varphi_{at} = -\frac{e^2}{r} \qquad [3]$$

2 EXPERIMENTAL

Resolvendo primeiramente o potencial de repulsão, podemos ver explicitamente que a expressão [2], nos mostra a solução geral de uma equação diferencial e para montarmos esta equação diferencial, podemos considerar $d\varphi$ em um ponto distante do átomo, temos φ

$$\varphi \propto \frac{d\varphi}{dr} \qquad [4]$$

e logo podemos atribuir uma constante de proporcionalidade $\frac{1}{a}$, sendo $a = \frac{\pi m e^2}{\varepsilon_0 h^2}$

$$\varphi = -\frac{1}{a}\frac{d\varphi}{dr}$$

$$\frac{1}{a}\frac{d\varphi}{dr} + \varphi = 0 \qquad [5]$$

integrando [5]

$$\int \frac{d\varphi}{\varphi} = -a\int dr$$

$$\ln \varphi_{rep} = -ar + b$$

$$\varphi_{rep} = e^{-ar+b}$$

$$\varphi_{rep} = e^{-ar}e^{b}$$

$$\varphi_{rep} = be^{-ar} \qquad [6]$$

Agora para calcularmos o potencial total do átomo precisamos de uma equação e considerando a forma do átomo como o de uma esfera, podemos utilizar uma equação diferencial esférica, que corresponda com o potencial. A

equação diferencial esférica mais adotada para este tipo de solução é a equação de Laplace.

$$\nabla^2\varphi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\,\mathrm{sen}(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\mathrm{sen}(\theta)\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\,\mathrm{sen}^2(\theta)}\left(\mathrm{sen}(\theta)\frac{\partial^2\varphi}{\partial\phi^2}\right) \quad [7]$$

para a simetria azimutal o φ í independende de ϕ e é invariante com respeito ao eixo z. logo a equação de Laplace reduz a

$$\nabla^2\varphi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\,\mathrm{sen}(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\mathrm{sen}(\theta)\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\right) \quad [8]$$

mas como consideramos o potencial somente radial, trabalharemos somente a parte radial da equação de Laplace:

$$\nabla^2\varphi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right) \quad [9]$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right) = 0 \quad [10]$$

como o potencial é constante na extremidade (superfície) esférica, logo $\frac{d\varphi}{dr} = A$; A= Q, sendo Q = q_1q_2; A=e^2.

$$r^2\frac{d\varphi}{dr} = A$$

$$\int d\varphi = \int \frac{A}{r^2}dr$$

$$\varphi = -\frac{A}{r} + B$$

Tabela 1: das condições de contorno da figura 1 $r \to r_0$, $r \to r_{rep}$ e $r \to \infty$

logo $r \to \infty$	E para $r \to r_0$	e para $r \to r_{rep}$
$\varphi_{(\infty)} = -\frac{A}{\infty} + B$ $0 = -\frac{A}{\infty} + B$ $B = 0$	$-\varphi_{(r_0)} = -\frac{A}{r_0} + B$ $\frac{e^2}{r_0} = -\frac{A}{r_0} + 0$ $A = -e^2$	$\varphi_{rep} = -\frac{A}{r_{rep}} + B$, considerando que o $r_{rep} >> r_0$ $\varphi_{rep} = B$

sendo $B = b\exp^{-ar}$

Não há esta primeira parte porque para o potencial de repulsão consideramos somente o potencial divergente e não convergente.

substituindo as constantes A e B na solução geral da equação diferencial de Laplace, temos

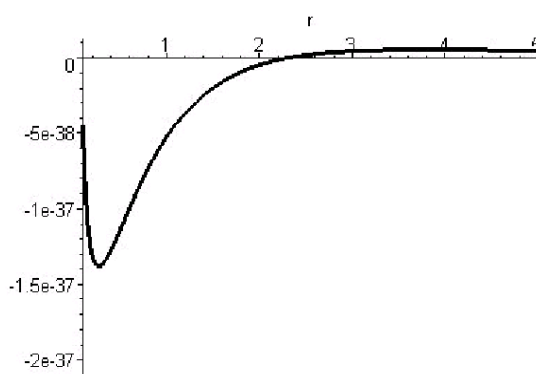
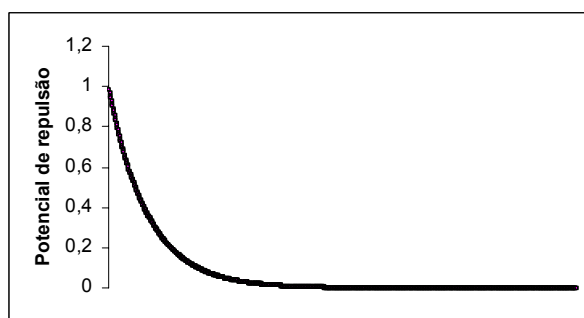
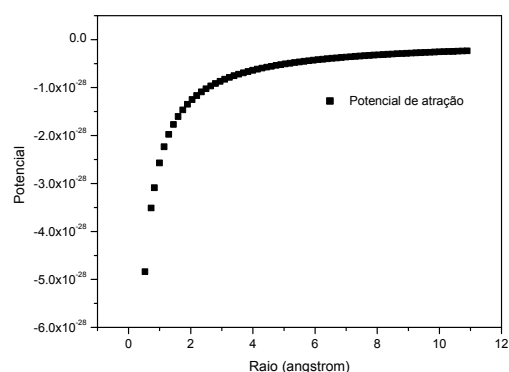
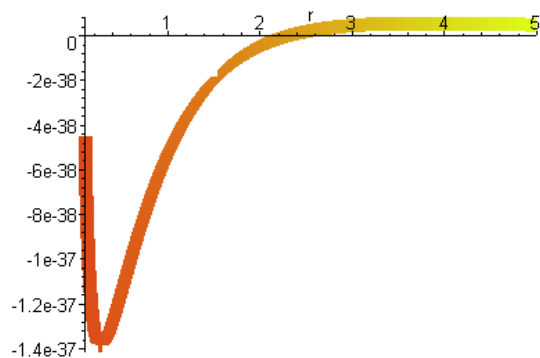
$$\varphi_{total} = -\frac{e^2}{r} + be^{-ar}$$

3 RESULTADO E DISCUSSÕES

Com a resolução do potencial total para ligação iônica podemos plotar os gráficos dos potenciais de atração (figura #) e repulsão (figura #) separadamente e para vermos o comportamento do potencial total teremos que somá-los, esta soma no resulta numa curva, qual possui um poço de potencial que varia de substância para substância[4]. Neste caso podemos também achar evidentemente o campo elétrico $\vec{E}_{(r)}$ para a ligação iônica, sendo este por definição

$$\vec{E}_{(r)} = \vec{\nabla}\varphi_{(r)} \qquad [11]$$

$$E_{(r)} = -\frac{e^2}{r^2} + ab\cdot\exp^{-ar} \qquad [12]$$

do mesmo modo vimos que o $\vec{E}_{(r)}$ é convergente para o potencial atrativo e divergente para o potencial repulsivo.

Referências:

1. Karapétiantz, M. Drakine, S. *Constitution de la Matérie*, ed. MIR, 1980. 368 p.
2. BARROW, G. M. *Physical-Chemistry*, ed. McGraw-Hill, 1961. 694 p.
3. Metz, C. R. *Físico-Química*, ed. McGraw-Hill, 1979. 623 p.
4. Landau, L. D. *Molecules*, Ed. MIR, 1987. 247 p.